

Рис. 1. Зависимость полной мощности излучения от длины волны.

На рис. 1 приведена зависимость полной мощности излучения усредненной по периоду колебания частицы в поле циркулярно поляризованной волны от длины волны. Видно, что полная мощность излучения обратно пропорциональна квадрату длины волны. Для длины волны 55 мкм полная мощность излучения соответствует 0,25 аВт, а для 90 мкм – 0,1 аВт. Приведенный результат может использоваться для интерпретации экспериментов на линейных ускорителях.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № 1269).

1. Андреев С.Н. Макаров В. П. и др., Квантовая электроника. 39, 68 (2009).
2. Галкин А. Л., Коробкин В. В. и др., ЖЭТФ, 127, 1195 (2007).
3. Galkin A. L., Romanovsky M. Yu. et al., Phys. of Plasmas 15, 023104 (2008).

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЯ $\text{Sr}_3\text{IrO}_7$

Андреев С.Н.<sup>1\*</sup>, Мазуренко В.В.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [kotkescha@mail.ru](mailto:kotkescha@mail.ru)

## MODELING OF ELECTRONIC AND CRYSTAL STRUCTURE OF $\text{Sr}_3\text{IrO}_7$

Andreev S.N.<sup>1\*</sup>, Mazurenko V.V.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work is devoted to the investigation of the crystal structure and electronic properties of  $\text{Sr}_3\text{IrO}_7$ . To solve this problem the first-principles molecular dynamics simulations were used. Having calculated an equilibrium atomic structure we analyze the electronic excitation spectrum.

В последнее время возрастает интерес к соединениям иридия со структурой Рудлесдена-Поппера ( $\text{Sr}_{n+1}\text{Ir}_n\text{O}_{3n+1}$ ), ярким их представителем является  $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ . Одним из его свойств является одинаковый порядок величины гибридизации, кулоновских взаимодействий и спин-орбитальной связи, что существенно усложняет теоретическое описание. Согласно экспериментам в структуре  $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$  наблюдается беспорядок в кислородных позициях [1]. Что означает несколько возможных кристаллических структур, отличающихся друг от друга поворотами кислородных октаэдров на 11 градусов. Возможные варианты представлены на (рис. 1).

При помощи первопринципных методов расчета были определены атомные позиции кислорода в данном соединении. Установлено, что структура В на рисунке имеет наименьшую полную энергию. Для неё в рамках настоящего исследования были проведены LDA расчеты. На основании полученных результатов можно сказать, что основной вклад в электронную плотность состояний вносят 2p электроны кислорода и 5d электроны иридия. При этом до уровня Ферми локализованы  $t_{2g}$  орбитали, а после  $e_g$ . Что хорошо согласуется с результатами, представленными в работе [2].

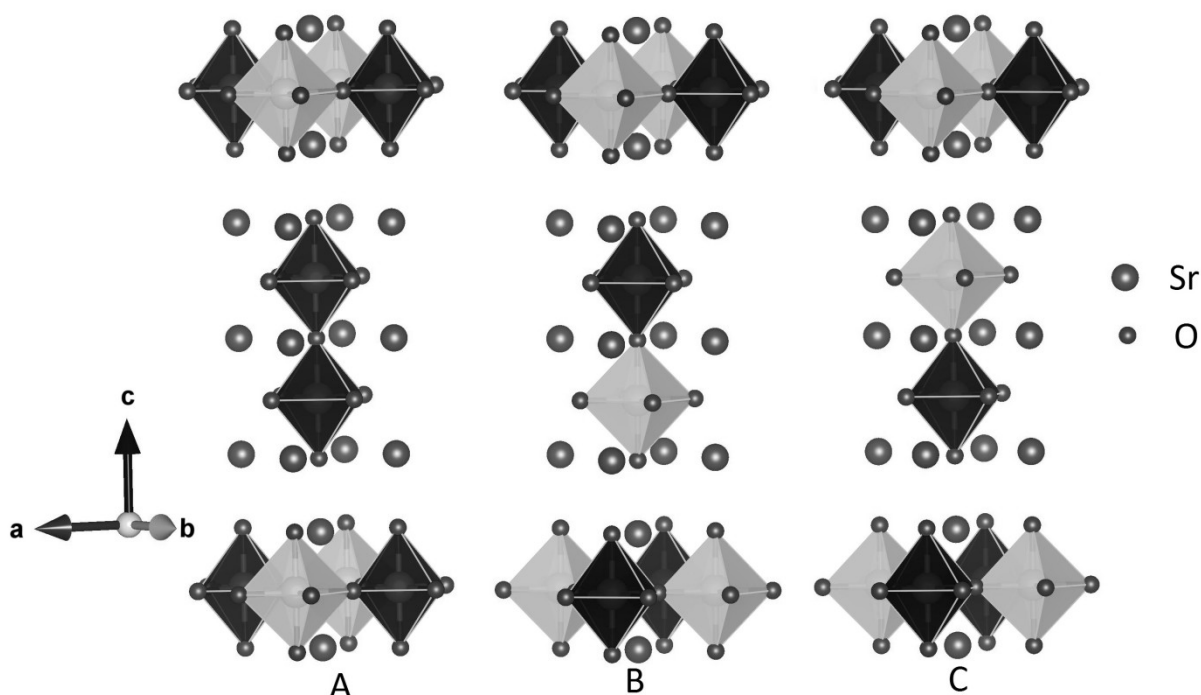


Рис. 1. Варианты кристаллической структуры  $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ . Черным и серым цветом изображены октаэдры, повернутые против и по часовой стрелке соответственно

В дальнейшем планируется работа в изучении магнитных свойств данного соединения, а также фазы под давлением.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 14-12-00306.

1. Villars P., Cenzual K. et al., Springer Materials (2011).
2. Cao G., Xin Y., Alexander C. S. and Crow J. E. PhysRevB., 66, 214412 (2002).